



TITLE:

表紙・目次ほか

AUTHOR(S):

CITATION:

表紙・目次ほか. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム
研究成果報告書 2019, 2018

ISSUE DATE:

2019-03

URL:

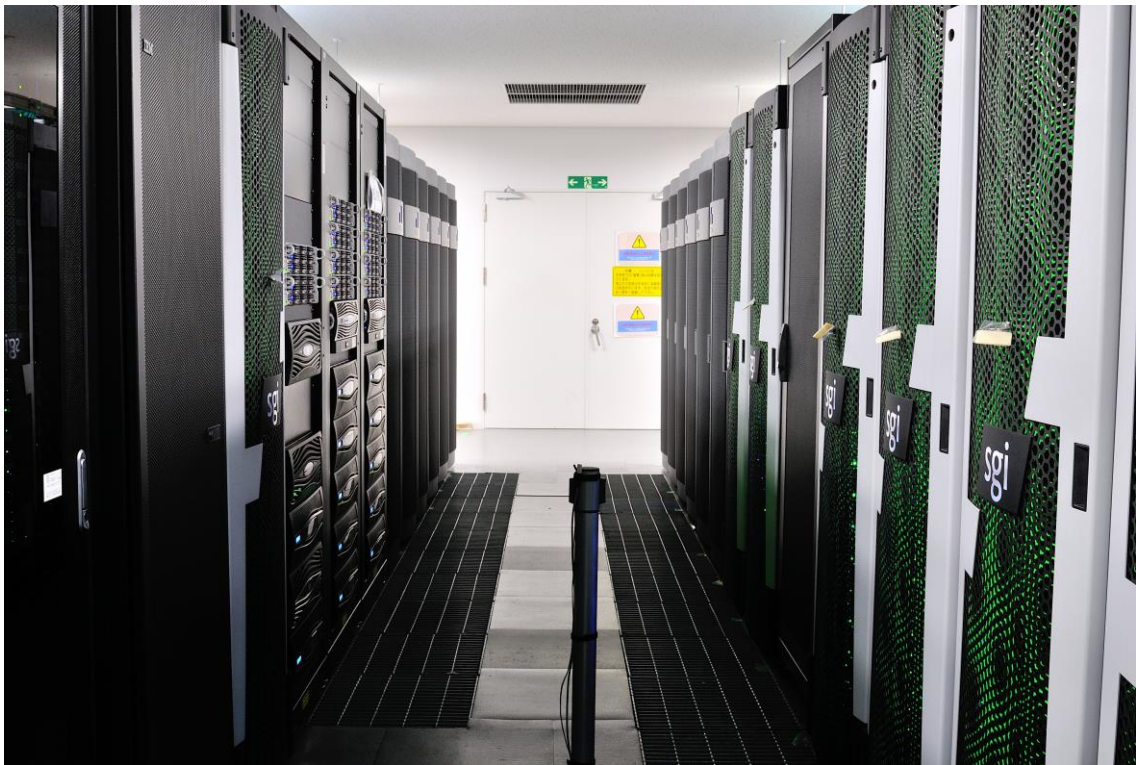
<http://hdl.handle.net/2433/241129>

RIGHT:

スーパーコンピュータシステム

平成 30 年度

研究成果報告書



京都大学化学研究所

はじめに

京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムは、1992 年 1 月より運用を開始した京都大学の研究設備で、複数のスーパーコンピュータが高速ネットワークで結ばれたネットワークスーパーコンピューティングシステムを提供しています。2016 年 1 月に導入されたシステムは、化学計算サーバとゲノムネット計算サーバとして SGI UV2000(総 CPU コア数 1,024)および SGI C2112(総 CPU コア数 3,000)を採用し、ゲノムネットウェブサーバとゲノムネット開発サーバとして DELL PowerEdge R930(総 CPU コア数 640)を採用しました。化学研究所スーパーコンピュータシステムは、分子シミュレーションをはじめとする計算化学関連の応用ソフトウェア、ゲノム解析やバイオインフォマティクス研究で必要となる分子生物学関連のデータベースとソフトウェアが整備されており、こうした分野の研究環境をサポートすることを目的に、学内外の研究者に広く開放されています。また、分子生物学関連のデータベースとソフトウェアはゲノムネットデータベースサービス (<http://www.genome.jp/>) として、広く国内外の研究者に提供しています。

この報告書は、平成 30 年度の 361 名の登録利用者の中から電子メールだけの利用者や、特に報告する内容のなかった利用者を除き、82 件の研究成果報告をまとめたものです。システム稼働状況、化学研究所 WWW サービスの利用状況、ゲノムネットデータベースサービス利用状況についても報告しています。

また、当システムは化学研究所共同利用・共同研究拠点の共通設備として利用され、平成 30 年度は 8 件の採択課題（バイオ情報学分野）推進に利用されました。

今後とも、スーパーコンピュータシステムをより良いものにしていくために、皆さまのご意見やご要望を以下のメールアドレスまでお寄せくださいますようお願い申し上げます。

送付先メールアドレス：spradm@scl.kyoto-u.ac.jp

2019 年 3 月

京都大学化学研究所 バイオインフォマティクスセンター
<http://www.bic.kyoto-u.ac.jp/>
スーパーコンピュータシステム
<http://www.scl.kyoto-u.ac.jp/>

化学研究所

| | | | |
|---|----------------------|-------|----|
| 新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析 | 時任 宣博 | | 1 |
| 高周期典型元素を含む新規結合様式の創出 | 水畑 吉行 | | 2 |
| フラットで完璧な π 共役二次元シート「シリセン」の理論設計とその物性探索 | 高橋 まさえ | | 3 |
| 特異な構造をもつ有機分子の電子的性質 | 村田 靖次郎 | | 4 |
| punicafolin及びmacranganinの配座解析 | 上田 善弘 | | 5 |
| リビングラジカル重合法を用いたヤヌス型ボトルブラシの合成と高次構造の創製 | 榊原 圭太 | | 6 |
| 透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察 | 登阪 雅聡 | | 7 |
| 含歪み π 共役化合物の合成とその物性評価 | 茅原 栄一 | | 8 |
| 電子不足部位を有する環状 π 共役分子の合成 | 橋本 土雄磨 | | 9 |
| 新規ラジカル重合の開発 | 藤田 健弘 | | 10 |
| 有機デバイスの基礎科学と高機能化 | 梶 弘典 | | 11 |
| 界面の振動分光学 | 長谷川 健 | | 12 |
| EELSスペクトルの計算機シミュレーション | 根本 隆 | | 13 |
| X線管からのスペクトル解析 | 正岡 聖 | | 14 |
| 効率的有機分子変換反応を可能とする新規金属触媒の設計と合成 | 中村 正治 | | 15 |
| バイオインフォマティクス実習 | チョウ ルイシャン | | 16 |
| 赤潮期間に沿岸生態システムの巨大ウイルスと藻類と細菌との相互関係分析 | 夏 駿 | | 17 |
| 海洋巨大ウイルス宿主同定に関する研究 | 孟 令傑 | | 18 |
| 生物情報ネットワークの解析と制御 | 阿久津 達也 | | 19 |
| 数理モデルによる生体ネットワーク制御手法の開発 | 田村 武幸 | | 20 |
| 次世代シーケンシングデータの解析 | 森 智弥 | | 21 |
| 新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析 | 郭 晶東 | | 22 |
| 化学生命科学研究領域の研究報告 | 緒方 博之 | | 23 |
| 海洋性プランクトン群の進化と生態についての研究 | Blanc-Mathieu Romain | | 25 |
| 海洋の真核プランクトンと巨大ウイルスの生物地理に関する研究 | 遠藤 寿 | | 26 |
| 巨大ウイルスゲノムの解析 | 吉川 元貴 | | 28 |
| 炎症性腸疾患における腸内微生物叢のメタゲノム解析 | 西山 拓輝 | | 29 |
| 配列類似性に基づいたウイルスゲノム分類法の開発 | 黒西 愛 | | 30 |
| メガウイルス科のDNAポリメラーゼ遺伝子を標的とするアンプリコン解析 | 李 岩沢 | | 31 |
| KEGG Orthologyに関する研究 | 荒巻 拓哉 | | 32 |
| 海洋巨大ウイルスとその宿主の多様性解析について | Prodinger Florian | | 33 |

| | | | |
|----------------------------|-------|-------|----|
| 共起ネットワーク解析に基づく腸内細菌のメタゲノム解析 | 加藤 恭崇 | | 34 |
| 海洋微生物生態系における種間相互作用の研究 | 金子 博人 | | 35 |
| 巨大ウイルスの分離 | 吉田 亘騎 | | 36 |

エネルギー理工学研究所

| | | | |
|--------------|-------|-------|----|
| ナノ炭素材料の理論的研究 | 小島 崇寛 | | 37 |
|--------------|-------|-------|----|

防災研究所

| | | | |
|-----------------|-------|-------|----|
| SSEに伴う海面地殻変動の推定 | 井上 智裕 | | 38 |
|-----------------|-------|-------|----|

理学研究科

| | | | |
|---|-------|-------|----|
| がん遺伝子に見られるグアニン四重鎖構造を検出する結合性環状ポリアミドリガンドの開発 | 朝光 世煌 | | 39 |
| 量子化学計算と固体NMRを用いた新規無機物質の構造解析 | 野田 泰斗 | | 40 |
| 分子性導電・磁性材料の設計と理論的解析 | 中野 義明 | | 41 |

薬学研究科

| | | | |
|-----------------------|-------|-------|----|
| 生物活性化合物の創製を指向した有機化学研究 | 大野 浩章 | | 42 |
|-----------------------|-------|-------|----|

工学研究科

| | | | |
|--------------------------------------|--------|-------|----|
| エポキシ樹脂の架橋反応による構造形成と力学特性発現の関係の評価 | 内藤 悠太 | | 43 |
| プラズマ曝露により形成される材料中の局所構造解析 | 吉川 侑汰 | | 44 |
| カーボンナノリングとカーボンナノチューブの相互作用 | 三木 康嗣 | | 45 |
| 遷移金属触媒を用いた新規変換反応 | 岡本 和紘 | | 46 |
| 有機活性種を駆使した新規反応開発と機能性物質の合成 | 岡本 和紘 | | 47 |
| 光触媒・光電極による高効率水分解システムの開発 | 東 正信 | | 48 |
| 触媒有機化学に関する研究 | 辻 康之 | | 49 |
| 13族元素含有有機金属錯体の特異な光学特性の機構解明 | 伊藤 峻一郎 | | 50 |
| HOPG基板上における分子配列のモデリング | 松田 建児 | | 51 |
| 吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討 | 鈴木 哲夫 | | 52 |
| ATR-FTIR法を用いた高分子成形プロセスの品質管理法の開発 | 引間 悠太 | | 53 |
| 溶媒依存性らせん反転を示すポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の構造解明 | 長田 裕也 | | 54 |
| 計算化学的手法による有機物および無機物の熱物性・輸送特性予測 | 松本 充弘 | | 55 |

エネルギー科学研究科

| | | | |
|--------------------|-------|-------|----|
| エネルギー機能材料の電子構造と光物性 | 蜂谷 寛 | | 56 |
| 軽金属・合金の力学特性 | 馬淵 守 | | 57 |
| 多孔質金属の表面特性 | 袴田 昌高 | | 58 |
| 変調磁場による微結晶の三次元配向 | 木村 史子 | | 59 |

農学研究科

| | | | |
|--------------------------|-------|-------|----|
| 磁場配向を利用した固体NMR解析手法の開発 | 久住 亮介 | | 60 |
| 一酸化炭素資化菌と水圏ウイルスの分子生物学的研究 | 吉田 天士 | | 61 |

人間・環境学研究科

| | | | |
|--------------------------|-------|-------|----|
| 有機分子性結晶の気体吸着特性の解析 | 津江 広人 | | 62 |
| 三次元 π 共役分子の合成の機能性の創出 | 廣戸 聡 | | 63 |

高等研究院

| | | | |
|---------------------------------|-------|-------|----|
| 有機構造体を用いたイオン伝導体合成 | 堀毛 悟史 | | 64 |
| 自己集合を利用したタンパク質のカプセル化 | 藤田 大士 | | 65 |
| 混合マトリクス膜中のガス輸送特性に関する計算機シミュレーション | ウ チイ | | 66 |

福井謙一記念研究センター

| | | | |
|-----------------|------|-------|----|
| 振電相互作用に関する理論的研究 | 佐藤 徹 | | 67 |
|-----------------|------|-------|----|

産官学連携本部

| | | | |
|--|-------------------|-------|----|
| 固液界面におけるエネルギー変換 | 湊 丈俊 | | 68 |
| 電池材料のラマンスペクトルの計算 | 山中 俊朗 | | 70 |
| フッ化物シャトル電池における、塩可溶性のLiBOBの効果とBiF ₃ 電極の電気化学的特性 | CelikKucuk Asuman | | 71 |

京都大学以外

| | | | |
|--|-------|-------|----|
| 生体分子情報データベースの開発とその応用 | 五斗 進 | | 73 |
| 遺伝子情報を用いた海洋生態系研究 | 西村 陽介 | | 74 |
| グラフに基づく分子系統解析手法の開発と適用 | 松井 求 | | 75 |
| 典型元素を活用した機能性材料の開発 | 吾郷 友宏 | | 76 |
| 規則性合金の触媒作用に関する理論的研究 | 古川 森也 | | 77 |
| カロテノイドデータベース化学フィンガープリントを用いたカロテノイドの生合成パスウェイの再構築 | 藪崎 純子 | | 78 |
| 密度汎関数法を用いたNO還元用代替触媒探索 | 蒲池 高志 | | 79 |

| | | | |
|--------------------------------------|---------------|-------|----|
| 菌類の系統解析 | 齋藤 勝晴 | | 80 |
| 琵琶湖沖に生息する細菌・ウイルスのメタゲノム解析 | 岡崎 友輔 | | 81 |
| 高次高調波によるアト秒X線パルスの増幅 | Carles Serrat | | 82 |
| スギゲノムの解読と解析 | 笠原 雅弘 | | 83 |
| スギゲノムの解読と解析 | 藤野 健 | | 84 |
| タンパク質の電子状態計算 | 平野 敏行 | | 85 |
| アミノアシルtRNA合成酵素の系統解析で示すミトコンドリアのモザイク起源 | 浜口 悠貴 | | 86 |

スーパーコンピュータシステム

| | | | |
|------------------------|-----------------------------------|-------|-----|
| システム稼働状況 | 西川 和嗣 福本 淳司 大久保 宏一 上原 英也 | | 87 |
| 京都大学化学研究所WWWサービスの利用状況 | 西川 和嗣 | | 92 |
| ゲノムネットサービス利用統計 | 西川 和嗣 | | 93 |
| スーパーコンピュータシステム講習会等開催履歴 | 福本 淳司 | | 127 |
| 平成30年度研究課題一覧 | | | 133 |

京都大学化学研究所
スーパーコンピュータシステム

〒611-0011 京都府宇治市五ヶ庄

TEL 0774-38-3265

spradm@scl.kyoto-u.ac.jp

<http://www.scl.kyoto-u.ac.jp>